

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

по учебной работе

_____ Э.Ю. Майкова
« ____ » _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)»
**«Информационные технологии в устойчивом развитии химико-
технологических производств»**

Направление подготовки магистров 18.04.01 Химическая технология

Направленность (профиль) – Химия и технология биологически активных
веществ

Тип задач профессиональной деятельности – научно-исследовательский;
организационно-управленческий

Форма обучения – очная

Химико-технологический факультет

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Тверь 20__

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки магистров в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:
профессор кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС
« ____ » _____ 20 __ г., протокол № ____.

Заведующий кафедрой

М.Г. Сульман

Согласовано:
Начальник учебно-методического
отдела УМУ

Д.А.Барчуков

Начальник отдела
комплектования
зональной научной библиотеки

О.Ф. Жмыхова

1. Цель и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины «Информационные технологии в устойчивом развитии химико-технологических производств» является получение углубленных знаний в области современного программного обеспечения и компьютерных технологий, используемых для обработки и анализа научной и производственной информации, разработки, управления и мониторинга химико-технологических процессов.

Задачами дисциплины являются:

- формирование представления о математическом и компьютерном моделировании, информационных системах обработки научной информации, принципах планирования и организации экспериментов;
- формирование навыков компьютерного моделирования, обработки данных; работы с современным программным обеспечением, используемым в научной и производственной областях деятельности;
- формирование способности использовать программное обеспечение в целях разработки, управления, мониторинга химико-технологических процессов, организации и управления химическими предприятиями.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательной части Блока 1 ОП. Для изучения курса требуются знания, умения и навыки, полученные в процессе изучения дисциплин: «Информатика», «Математика», «Физическая химия», «Общая химическая технология», «Компьютерная графика и проектирование технологических схем», «Процессы и аппараты химической технологии», «Химические реакторы», «Моделирование химико-технологических процессов», «Системы управление химико-технологическими процессами», «Проектирование и оборудование предприятий химической промышленности».

Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем при изучении дисциплин: «Основы научно-исследовательской работы», «Научно-практический семинар». Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем для выполнения научно-исследовательской работы, написании статей и тезисов, при подготовке выпускной квалификационной работы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1 Планируемые результаты обучения по дисциплине

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

УК-4. Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИУК-4.3. *Использует современные информационно-коммуникативные технологии и средства для коммуникации.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

31.1. Современные компьютерные технологии планирования исследований, получения и обработки результатов научных экспериментов, сбора, обработки, хранения, представления и передачи научной и производственной информации.

Уметь:

У1.1. Применять современные информационно-коммуникативные технологии для решения научных и производственных задач.

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

ОПК-4. Способен находить оптимальные решения при создании продукции с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИОПК-4.1. *Демонстрирует понимание задач цифровизации управления на различных уровнях химико-технологических производств.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

32.1. Современное программное обеспечение, используемое в научной и производственной областях деятельности.

Уметь:

У2.1. Выбирать и использовать определенные программные средства, применяемые в научной и производственной деятельности.

ИОПК-4.2. *Применяет современные методы моделирования и оптимизации химико-технологических процессов с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

33.1. Основы математического моделирования на основании научных и производственных данных.

Уметь:

У3.1. Применять методы математического и компьютерного моделирования в научной и производственной областях деятельности.

ИОПК-4.3. *Использует стандартные и оригинальные программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

33.1. Современные программные средства, используемые для обработки, анализа и моделирования опытных и технологических данных, разработки, управления и мониторинга химико-технологических процессов.

Уметь:

У3.1. Использовать современные программные средства для обработки, анализа и моделирования опытных и технологических данных, разработки, управления и мониторинга химико-технологических процессов.

3.2. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций

Проведение лекционных занятий; выполнение лабораторных работ; самостоятельная работа под руководством преподавателя.

4. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости дисциплины по видам учебной работы

Вид учебной работы	Зачетные единицы	Академические часы
Общая трудоемкость дисциплины	4	144
Аудиторные занятия (всего)		36
В том числе:		
Лекции		12
Практические занятия (ПЗ)		не предусмотрены
Лабораторные работы (ЛР)		24
Самостоятельная работа обучающихся (всего)		72+36(экз)
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к лабораторным занятиям		40
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет)		не предусмотрен
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		32+36(экз)
Практическая подготовка при реализации дисциплины (всего)		0

5. Структура и содержание дисциплины

5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули дисциплины, трудоемкость в часах и виды учебной работы

№	Наименование модуля	Труд-ть часы	Лекции	Практич. занятия	Лаб. практикум	Сам. работа
1	Компьютерные технологии как инструмент обработки и интерпретации данных	12	1	-	1	6+4(экз)
2	Компьютерные технологии как инструмент моделирования систем	12	1	-	-	6+5(экз)
3	Компьютерные технологии как инструмент математического моделирования	21	2	-	4	10+5(экз)
4	Компьютерные технологии подготовки и оформления научной документации	19	1	-	4	10+4(экз)
5	Компьютерное кодирование химических соединений	24	2	-	6	12+4(экз)
6	Применение методов искусственного интеллекта	13	1	-	2	6+4(экз)

	для физико-химических исследований					
7	Компьютерные системы стратегического и оперативного планирования	20	2	-	3	10+5(экз)
8	Математическое моделирование химико-технологических процессов	23	2	-	4	12+5(экз)
Всего на дисциплину		144	12	-	24	72+36(экз)

5.2. Содержание дисциплины

МОДУЛЬ 1 «КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ КАК ИНСТРУМЕНТ ОБРАБОТКИ И ИНТЕРПРЕТАЦИИ ДАННЫХ»

Место эмпирических исследований в научном процессе. Основные методы обработки данных, используемые в статистических пакетах. Обзор пакетов статистического анализа. Классификация пакетов статистического анализа. Обзор основных возможностей пакетов. Примеры использования пакетов для проведения многомерного анализа данных.

МОДУЛЬ 2 «КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ КАК ИНСТРУМЕНТ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИСТЕМ»

Понятие жизненного цикла системы. Методология RUP. UML-универсальный язык моделирования. Основные элементы. Диаграммы UML и их назначение.

МОДУЛЬ 3 «КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ КАК ИНСТРУМЕНТ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ»

Дискретизация баз наблюдений системы-пространства и времени при использовании компьютерных технологий. Основные возможности и ограничения использования компьютерных технологий для решения научных задач. Перспективы развития компьютерных технологий математического моделирования. Компьютерные технологии имитационного моделирования. Основные понятия имитационного моделирования. Компьютерные средства и системы имитационного моделирования. Примеры научных и производственных систем, исследуемых с использованием имитационного моделирования.

МОДУЛЬ 4 «КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОДГОТОВКИ И ОФОРМЛЕНИЯ НАУЧНОЙ ДОКУМЕНТАЦИИ»

Понятия о стандартах оформления научной документации. Шаблоны и их использование. Редакторы математических формул, редакторы научной графики.

МОДУЛЬ 5 «КОМПЬЮТЕРНОЕ КОДИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»

Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, кодирование

молекул; таблицы смежности и матрицы связности. Расчетные методы компьютерной химии. Изучение термодинамических параметров химических соединений: концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул; метод молекулярной динамики (общие принципы); метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов; метод Монте-Карло, квантовые методы исследования.

МОДУЛЬ 6 «ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ»

Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований. Экспертные системы, фреймы и семантические сети.

МОДУЛЬ 7 «КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ СТРАТЕГИЧЕСКОГО И ОПЕРАТИВНОГО ПЛАНИРОВАНИЯ»

Средства управления проектами. Методы сетевого планирования и их реализация в компьютерных технологиях. Автоматизация построения бизнес-планов. Компьютерная поддержка принятия управленческого решения. Компьютерное планирование органического синтеза. Формально-логические и эмпирические методы планирования. Синтетический и ретросинтетический подходы.

МОДУЛЬ 8 «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»

Математическое моделирование химико-технологических процессов. Решение прямой задачи химической кинетики. Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров. Исследование механизмов протекания реакции: понятия о кинетических расчетах, планирование кинетических экспериментов, обратная задача химической кинетики (виды параметрической идентификации в зависимости от имеющихся представлений), метод решения обратной задачи химической кинетики (построение целевых функций).

5.3. Лабораторные работы

Таблица 3. Лабораторные работы и их трудоемкость

Порядковый номер модуля. Цели лабораторных работ	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость в часах
Модуль 1 Цель: формирование представлений о приемах компьютерной обработки информации.	Принципы компьютерной обработки экспериментов. Формирование информационных баз данных.	1
Модуль 3 Цель: формирование представлений о принципах компьютерного и математического моделирования.	Принципы математического моделирования. Примеры моделирования производственных процессов. Моделирование и обработка научных данных.	4

Модуль 4 Цель: формирование представлений о методах оформления документов	Оформление научных документов.	1
Модуль 5 Цель: формирование навыков кодирования химических соединений	Построение деревьев синтеза веществ. Расчет термодинамических и энергетических параметров молекул квантовыми методами Оптимизация геометрии молекул методом молекулярной динамики Изучение визуализации молекул и получение информации о конформации электронных облаков в сложных молекулах	6
Модуль 6 Цель: формирование навыков построения экспертных систем.	Основы компьютерных нейронных сетей. Основы генетических алгоритмов.	2
Модуль 7 Цель: формирование навыков планирования эксперимента.	Компьютерное планирование производственного процесса. Системы автоматизированного проектирования.	3
Модуль 8 Цель: формирование навыков математического моделирования химико-технологических процессов.	Изучение вопросов интеграции, обмена данными между компьютерными технологиями. Принципы построения компьютерных технологий в автоматизированном производстве. Решение задачи параметрической идентификации кинетических моделей. Изучение методов исследования поведения целевой функции при параметрической идентификации. Решение задач с применением ЭВМ на определение пути протекания химических реакций	4

5.4. Практические занятия

Учебным планом практические занятия не предусмотрены.

6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости

6.1. Цели самостоятельной работы

Основными целями самостоятельной работы магистрантов является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых, рациональных и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

6.2. Организация и содержание самостоятельной работы

Самостоятельная работа заключается в изучении отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендуемой им учебной литературе, в подготовке к лабораторным занятиям, к текущему контролю успеваемости; подготовке к экзамену.

После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, студентам выдаются задания на лабораторные занятия. Студенты выполняют задания в часы СРС в течение семестра в соответствии с освоением учебных разделов. Защита выполненных заданий производится поэтапно в часы лабораторных занятий. Оценивание осуществляется путем устного опроса проводится по содержанию и качеству выполненного задания.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1. Основная литература по дисциплине

1. Фаддеев, М.А. Элементарная обработка результатов эксперимента : учебное пособие / М.А. Фаддеев; Фаддеев М.А. - Нижний Новгород : Нижний Новгород : ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2010. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - URL: <https://e.lanbook.com/book/152927> . - (ID=81446-0).

2. Зубова, Е.Д. Информационные технологии в профессиональной деятельности : учебное пособие для вузов / Е.Д. Зубова. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 03.08.2022. - ISBN 978-5-8114-9347-0. - URL: <https://e.lanbook.com/book/254681> . - (ID=149273-0).

3. Маликов, Р.Ф. Основы математического моделирования : учебное пособие для вузов / Р.Ф. Маликов. - 2-е изд. - Москва : Юрайт, 2022. - Образовательная платформа Юрайт. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-534-15279-1. - URL: <https://urait.ru/bcode/488153> . - (ID=148222-0).

7.2. Дополнительная литература по дисциплине

1. Цымбал, В.П. Синергетическая концепция создания моделей и технологий : учебное пособие для вузов / В.П. Цымбал, П.А. Сеченов, И.А. Рыбенко. - Москва : Юрайт, 2022. - (Высшее образование). - Образовательная платформа Юрайт. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-534-15011-7. - URL: <https://urait.ru/bcode/486387> . - (ID=145706-0).

2. Пен, Р.З. Статистические методы математического моделирования, анализа и оптимизации технологических процессов : учебное пособие для вузов / Р.З. Пен, В.Р. Пен. - 2-е изд. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 03.10.2022. - ISBN 978-5-507-45300-9. - URL: <https://e.lanbook.com/book/264239> . - (ID=141007-0)

3. Петраков, Ю.В. Теория автоматического управления технологическими системами : учеб. пособие для вузов по направлению подготовки 220100 -

Системный анализ и упр. / Ю.В. Петраков, О.И. Драчев. - М. : Машиностроение, 2008. - 336 с. : ил. + 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-217-03391-1 : 605 p. - (ID=92562-4)

4. Стрельцова, Е.Д. Методология научных исследований. Математическое моделирование как метод научного познания : учебное пособие / Е.Д. Стрельцова; Южно-Российский государственный политехнический университет имени М.И. Платова. - Новочеркасск : Южно-Российский государственный политехнический университет имени М.И. Платова, 2016. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-9997-0610-2. - URL: <https://e.lanbook.com/book/180935> . - (ID=145340-0).

5. Черный, А.А. Компьютерные дополненные программы математического моделирования и расчетов по математическим моделям : учеб. пособие для вузов / А.А. Черный. - Пенза : Пензенский гос. ун-т , 2007. - Внешний сервер. - Текст : электронный. - URL: <https://zzapomni.com/pgu-penza/chernyyu-komputernye-dopolnennye-2007-9124> . - (ID=80860-0)

6. Черный, А.А. Математическое моделирование при планировании экспериментов на трех, четырех, пяти уровнях фактора и при неодинаковом количестве уровней первого и второго фактора : учеб. пособие / А.А. Черный. - Пенза : Пензенский гос. ун-т , 2006. - Внешний сервер. - Текст : электронный. - URL: <https://zzapomni.com/pgu-penza/chernyyu-matematicheskoe-modelirova-2006-9139> . - (ID=81205-0)

7. Соловьев, М.Е. Компьютерная химия : в составе учебно-методического комплекса / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. - Москва : Солон - Пресс, 2005. - 535 с. : ил. - (Библиотека студента) (УМК-У). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-98003-188-X : 274 p. 94 к. - (ID=59885-10).

8. Косивцов, Ю.Ю. Применение ЭВМ в химии, химической технологии и биотехнологии : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / Ю.Ю. Косивцов, А.И. Сидоров, В.В. Алферов; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2005. - 142 с. : ил. - (УМК-У). - Библиогр. : с. 142. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7995-0313-9 : [б. ц.]. - (ID=59422-107).

7.3. Методические материалы

1. Манаенков, О.В. Моделирование структур химических соединений с помощью пакетов программ ACD/Chemsketch, Chemoffice, Hyperchem : учеб. пособие для студентов направлений подготовки 240100 Хим. технология, 020100 Химия, 240700 Биотехнология и спец. 020201 Фундамент. и прикл. химия / О.В. Манаенков, Ю.Ю. Косивцов, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - 1-е изд. - Тверь : ТвГТУ, 2013. - Сервер. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-7995-0681-0 : 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/99468> . - (ID=99468-1)

2. Манаенков, О.В. Моделирование структур химических соединений с помощью пакетов программ ACD/Chemsketch, Chemoffice, Hyperchem : учеб. пособие для студентов направлений подготовки 240100 Хим. технология, 020100 Химия, 240700 Биотехнология и спец. 020201 Фундамент. и прикл. химия / О.В.

Манаенков, Ю.Ю. Косивцов, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - 1-е изд. - Тверь : ТвГТУ, 2013. - 84 с. : ил. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7995-0681-0 : [б. ц.]. - (ID=100791-71)

3. Учебно-методический комплекс дисциплины "Информационные технологии в устойчивом развитии химико-технологических производств" Направление подготовки магистров 18.04.01 Химическая технология, Направленность (профиль): Технология и переработка полимеров, Направленность (профиль): Комплексная переработка биоэнергетических ресурсов, Направленность (профиль): Химия и технология биологически активных веществ / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. Биотехнологии, химии и стандартизации ; сост. Ю.Ю. Косивцов. - Тверь, 2022. - (УМК). - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/104545> . - (ID=104545-1)

7.4. Программное обеспечение по дисциплине

1. Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).

2. Microsoft Office 2019 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

Avogadro 1.0.1 (Freeware version) - 3D визуализация.

Кинетика v1.2.

ACD ChemSketch 10 (Freeware version).

SpinWorks 2.53.

Model ChemLab 2.6.2.

3D Angles 3.0.

«Экспериментальная установка-ЭВМ».

ISIS Draw 2.4 (Freeware version).

ArgusLab 4.0.1 (Freeware version).

SALOME Version 9.9.0 (бесплатная версия).

Eigenmath (бесплатная версия).

StatEx (бесплатная версия).

ConceptDraw Professional (бесплатная версия).

AnyLogic 6.4.1 (бесплатная версия).

7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет.

ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>

2. ЭКТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>

3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>

4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>

5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>

6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>
7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>
8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ" : сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНИПы и др.]. Диск 1,2,3,4. - М. :Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст : электронный. - 119600 р. – (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов: <https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/104545>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины «Информационные технологии в устойчивом развитии химико-технологических производств» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных занятий, проведения защит и презентаций курсовых работ оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

Для проведения лабораторных работ имеются лаборатории с персональными компьютерами (наличие локальной вычислительной сети необязательно).

9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена

1. Экзаменационный билет соответствует форме, утвержденной Положением о рабочих программах дисциплин, соответствующих федеральным государственным образовательным стандартам высшего образования с учетом профессиональных стандартов. Типовой образец экзаменационного билета приведен в Приложении. Обучающемуся даётся право выбора заданий из числа, содержащихся в билете, принимая во внимание оценку, на которую он претендует.

Число экзаменационных билетов – 20. Число вопросов (заданий) в экзаменационном билете – 3 (1 вопрос для категории «знать» и 2 вопроса для категории «уметь»).

Продолжительность экзамена – 60 минут.

2. Шкала оценивания промежуточной аттестации в форме экзамена – «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

3. Критерии оценки за экзамен:

для категории «знать»:

выше базового – 2;

базовый – 1;

ниже базового – 0;

критерии оценки и ее значение для категории «уметь»:

отсутствие умения – 0 балл;

наличие умения – 2 балла.

«отлично» - при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» - при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» - при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» - при сумме баллов 0, 1 или 2.

4. Вид экзамена – письменный экзамен.

5. База заданий, предъявляемая обучающимся на экзамене:

1) Основные возможности и ограничения использования компьютерных технологий для решения научных задач.

2) Основные методы обработки данных, используемые в статистических пакетах.

3) Обзор пакетов статистического анализа. Классификация пакетов статистического анализа.

4) Понятие жизненного цикла системы. Методология RUP.

5) UML-универсальный язык моделирования. Основные элементы. Диаграммы UML и их назначение.

6) Научные и производственные системы с использованием имитационного моделирования.

7) Компьютерные технологии имитационного моделирования. Основные понятия имитационного моделирования.

8) Компьютерные средства и системы имитационного моделирования.

9) Дискретизация баз наблюдений системы-пространства и времени при использовании компьютерных технологий.

10) Возможные схемы параметрической идентификации исходя из информации о явном виде уравнений.

11) Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований.

12) Общие принципы кодирования химических формул.

13) Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, таблицы смежности и матрицы связности.

14) Изучение термодинамических параметров химических соединений: концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул; метод молекулярной динамики (общие принципы).

15) Изучение термодинамических параметров химических соединений: метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов; метод Монте-Карло, квантовые методы исследования.

16) Принципы компьютерного планирования органического синтеза.

17) Принципы применения в химии теории распознавания образов.

18) Использование экспертных систем в химии и химической технологии.

19) Экспертные системы, фреймы и семантические сети.

20) Компьютерная поддержка принятия управленческого решения. Компьютерное планирование органического синтеза.

21) Формально-логические и эмпирические методы планирования. Синтетический и ретросинтетический подходы.

22) Основные закономерности, исследование которых необходимо для изучения кинетики химической реакции.

23) Программы генерирования химических реакций.

24) Решение прямой задачи химической кинетики. Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров.

25) Методы оптимизации и решения системы дифференциальных уравнений, описывающих скорость химической реакции.

26) Методы проверки кинетической модели на плохую обусловленность и переопределенность.

27) Исследование механизмов протекания реакции: понятия о кинетических расчетах, обратная задача химической кинетики, метод решения обратной задачи химической кинетики.

Пользование различными техническими устройствами, кроме ЭВМ компьютерного класса и программным обеспечением, необходимым для решения поставленных задач, не допускается. При желании студента покинуть пределы аудитории во время экзамена экзаменационный билет после его возвращения заменяется.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов на экзаменационные вопросы и решенных на компьютере задач задавать студенту в устной форме уточняющие вопросы в рамках содержания экзаменационного билета, выданного студенту.

Иные нормы, регламентирующие процедуру проведения экзамена, представлены в Положении о текущем контроле успеваемости и промежуточной аттестации студентов.

9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета

Учебным планом зачет по дисциплине не предусмотрен.

9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы

Учебным планом не предусмотрены.

10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Студенты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки.

Студенты, изучающие дисциплину, обеспечиваются электронными изданиями или доступом к ним, учебно-методическим комплексом по дисциплине, включая методические указания к выполнению практических работ, всех видов самостоятельной работы.

В учебный процесс рекомендуется внедрение субъект-субъектной педагогической технологии, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций студентов по закрепленному за ним модулю дисциплины.

11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины

Содержание рабочих программ дисциплин ежегодно обновляется протоколами заседаний кафедры по утвержденной «Положением о структуре, содержании и оформлении рабочих программ дисциплин по образовательным программам, соответствующим ФГОС ВО с учетом профессиональных стандартов» форме.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки магистров 18.04.01 Химическая технология
Профиль – Химия и технология биологически активных веществ
Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»
Дисциплина «Информационные технологии в устойчивом развитии химико-
технологических производств»
Семестр 1

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

1. Задание для проверки уровня «знать» – или 0, или 1, или 2 балла:
Основные методы обработки данных, используемые в статистических пакетах.

2. Задание для проверки уровня «уметь» – или 0, или 2 балла:
Описать основные этапы и принципы тестирования и отладки математической модели.

3. Задание для проверки уровня «уметь» – или 0, или 2 балла:
С помощью базы данных программы постройте двухцепочечный фрагмент ДНК со следующей последовательностью мононуклеотидов: аденин (А) – тимин (Т) – гуанин (Г) – цитозин (Ц) – А – Г – Ц – Т – А – А – Г – Ц – Т – Ц – А. Далее: выявите наличие в структуре водородных связей, подсчитайте их количество между комплементарными азотистыми основаниями; определите примерный диаметр спирали и количество нуклеотидов, приходящихся на один виток спирали.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» - при сумме баллов 5 или 6;
«хорошо» - при сумме баллов 4;
«удовлетворительно» - при сумме баллов 3;
«неудовлетворительно» - при сумме баллов 0, 1 или 2 балла;

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман